

Espectroscòpia Molecular

Codi: 103283

Crèdits: 5

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Nanociència i Nanotecnologia	OB	3	1

Professor/a de contacte

Nom: Vicenç Branchadell Gallo

Correu electrònic: Vicenc.Branchadell@uab.cat

Utilització d'idiomes a l'assignatura

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: Sí

Grup íntegre en espanyol: No

Prerequisits

No hi ha cap prerequisit obligatori però és molt aconsellable haver superat i tenir presents les assignatures de "Enllaç Químic i Estructura de la Matèria", "Fonaments de Matemàtiques", "Mecànica i Ones", Física Clàssica", "Química dels Elements" i "Química Orgànica". És recomenable cursar simultàniament l'assignatura "Fenòmens Quàntics I".

Objectius

Aquesta assignatura està focalitzada a l'estudi i comprensió de la interacció entre la radiació electromagnètica i la matèria, i com aquesta interacció pot ser utilitzada en la caracterització estructural de molècules i materials. L'assignatura inclou alguns fonaments teòrics involucrats en la interacció radiació/matèria i d'algunes de les diferents tècniques espectroscòpiques més presents. Per a cada tipus de tècnica espectroscòpica, es pretén establir una connexió entre l'espectre i la informació estructural que se'n pot extreure. Es dona un pes especial a la simetria molecular i a la teoria de grups com a eina important per explicar determinats espectres.

Els objectius concrets de l'assignatura són els següents:

- entendre els fonaments bàsics de la interacció entre la radiació electromagnètica i la matèria.
- Entendre les regles que determinen la freqüències i les intensitats d'una transició.
- Saber com aplicar aquest coneixement per resoldre quantitativament i qualitativament problemes químics amb l'ajuda de l'espectroscòpia molecular.

Competències

- Aplicar els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia a la resolució de problemes de natura quantitativa o qualitativa en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia.

- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques, identificar-ne el significat i relacionar-les amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.
- Mantenir un compromís ètic.
- Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
- Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer i analitzar problemes físics, químics i biològics en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia i plantejar respostes o treballs adequats per a la seva resolució, incloent-hi en els casos necessaris l'ús de fonts bibliogràfiques.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.

Resultats d'aprenentatge

1. Analitzar situacions i problemes en l'àmbit de la física i la química, i plantejar respostes o treballs de tipus experimental utilitzant fonts bibliogràfiques.
2. Aplicar els continguts teòrics adquirits a l'explicació de fenòmens experimentals.
3. Aplicar els principis físics de les interaccions matèria-radiació a la interpretació d'espectres.
4. Aprendre de manera autònoma.
5. Avaluar els resultats experimentals de manera crítica i deduir-ne el significat.
6. Avaluar la millor metodologia espectroscòpica per a la resolució d'un problema estructural.
7. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
8. Descriure els fonaments de les espectroscòpies moleculars més significatives (ANAR, UV-visible, RMN, masses).
9. Dissenyar experiments senzills per a l'estudi de sistemes químicofísics simples.
10. Emprar la tecnologia de la informació i la comunicació per a la documentació de casos i problemes.
11. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
12. Identificar els principis físics que regeixen les interaccions matèria-radiació.
13. Interpretar les dades obtingudes a les mesures experimentals per a la caracterització d'un compost químic o un material.
14. Mantenir un compromís ètic.
15. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
16. Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
17. Proposar idees i solucions creatives.
18. Raonar de forma crítica.
19. Reconèixer i analitzar problemes físics i químics relacionats amb l'estructura de composts orgànics i inorgànics
20. Relacionar els principis físics de les interaccions matèria-radiació amb els senyals dels diferents espectres.
21. Relacionar la teoria de grups i les taules de caràcters amb la simetria de les molècules.
22. Relacionar les dades experimentals amb les propietats fisicoquímiques i/o anàlisi dels sistemes objecte d'estudi.
23. Resoldre problemes i prendre decisions.
24. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
25. Utilitzar correctament les eines informàtiques necessàries per a calcular, representar gràficament i interpretar les dades obtingudes, així com la seva qualitat.
26. Utilitzar programes de disseny gràfic per dibuixar fórmules químiques i les seves reaccions.

Continguts

1. Introducció a l'espectroscòpia Naturalesa de la radiació electromagnètica. Energia i tipus de radiació. Espectre electromagnètic i tècniques espectroscòpiques. Intensitat de les línies espectrals. Moment dipolar de la transició. Regles de selecció. Amplada de ratlla espectral. Principi d'incertesa. Escales de temps. Làsers.

2. Espectroscòpia de rotació i vibració de molècules diatòmiques

Aproximació de Born-Oppenheimer i Equació d'Schrödinger nuclear. Models del rotor rígid i de l'oscil·lador harmònic. Regles de selecció. Anharmonicitat. Energies de Dissociació.

3. Simetria Molecular

Elements i operacions de simetria. Grups puntuals de simetria. Classificació. Determinació sistemàtica del grup puntual d'una molècula. Aplicacions de la simetria. Isomeria òptica. Moment dipolar.

4. Teoria de grups

Propietats dels grups. Classes d'elements de simetria. Representacions reductibles i irreductibles. Espècies de simetria. Taules de caràcters. Descomposició de representacions reductibles en les seves components irreductibles.

5. Espectroscòpia de vibració de molècules poliatòmiques

Vibració de molècules poliatòmiques. Modes normals de vibració. Tipus de vibracions: tensió i deformació. Simetria dels modes normals de vibració. Regles de selecció. Efecte Raman. Polaritzabilitat. Regles de selecció. Aplicació de la teoria de grups a l'anàlisi vibracional. Regla de mútua exclusió.

6. Espectroscòpia electrònica

Espectroscòpia Atòmica. Termes Espectrals. Interacció Spin Òrbita. Transicions Permeses. Estat electrònic de molècules diatòmiques. Transicions electròniques en molècules diatòmiques. Estructura vibracional de les bandes electròniques. Principi de Franck-Condon. Transicions electròniques. Regles de selecció. Consideracions de simetria. Fluorescència i fosforescència. Espectroscòpia fotoelectrònica

7. Espectroscòpia de ressonància magnètica

Spin nuclear. Interacció amb un camp magnètic. Ressonància Magnètica Nuclear (RMN). Nivells energètics nuclears. Regles de selecció. Apantallament nuclear. El desplaçament químic. Acoblaments spin-spin. Nuclis equivalents. Sistemes de primer ordre. Equivalències química i magnètica. Aplicacions. Ressonància d'spin electrònic

Pràctiques d'aula informàtica

1. Espectroscòpia vibracional
2. Espectroscòpia electrònica

Metodologia

L'assignatura constarà de tres tipus d'activitats docents:

1. Classes teòriques

El professor desenvoluparà els continguts del programa a l'aula. Es disposarà de material de suport al Campus Virtual.

2. Classes de Problemes

Resolució d'alguns dels problemes proposats per a cada tema. Aquestes classes permeten aprofundir i/o reforçar alguns dels conceptes introduïts en les classes teòriques.

3. Pràctiques d'aula informàtica

Simulació d'espectres d'algunes molècules utilitzant els mètodes de la Química Quàntica.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Pràctiques d'aula	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 23, 24, 25, 26
Sessions de problemes	15	0,6	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24
Sessions teòriques	26	1,04	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 18, 19, 20, 21, 22, 23
Tipus: Autònomes			
Estudi personal	65	2,6	
Realització d'exercicis	5	0,2	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24

Avaluació

Exàmens

Al llarg del curs es realitzaran dos exàmens parcials que correspondran als temes 1-4 i 5-7, respectivament. Cada examen parcial tindrà un pes del 35% en la nota final, de manera que el conjunt dels dos exàmens parcials representarà el 70% de la nota final.

La nota mínima d'un examen parcial que permet calcular la mitjana del curs és de 4. Si no s'arriba a aquests mínims, al final del curs es poden recuperar un o els dos exàmens parcials. La nota obtinguda en la recuperació reemplaçarà la nota obtinguda en el primer intent. També és possible presentar-se a les recuperacions per millorar nota. En aquest cas l'última nota obtinguda en cada parcial és la que preval. Per tenir dret a presentar-se a una recuperació és obligatori haver-se presentat als dos exàmens parcials.

Treball de seguiment

Al llarg del curs es recolliran un cert nombre de proves del seguiment de l'alumne (problemes resolts individualment o en grup, proves curtes d'aula, etc). La nota mitjana d'aquests proves representarà el 15% de la nota final

Pràctiques d'aula

Al llarg del curs es realitzaran dues pràctiques d'aula obligatòries. El resultat d'aquestes pràctiques s'avaluarà mitjançant una prova específica que representarà el 15% de la nota final

Els requisits per superar l'assignatura són:

1. La nota de cada examen parcial ha de ser igual o superior a 4
2. La nota mitjana de l'assignatura ha de ser igual o superior a 5
3. La realització de les pràctiques d'aula és obligatòria

L'assignatura es considerarà no avaluable si no s'ha fet cap dels dos exàmens parcials. Per optar a la qualificació "Matrícula d'honor" es tindran en compte de manera preferent les notes obtingudes en els exàmens parcials.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Pràctiques d'aula	15	1	0,04	1, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26
Exercicis	15	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 10, 12, 13, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23
Exàmens	70	5	0,2	2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 12, 13, 14, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23

Bibliografia

Textos Bàsics:

- P. Atkins, J. de Paula, *Atkins' Physical Chemistry*, 8th Ed., Oxford University Press, 2005.
- C. N. Banwell, E. M. McCash, *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*, 4th Ed., McGraw Hill, 1994.
- A. Requena, J. Zúñiga, *Espectroscopía*, Pearson Prentice Hall, 2004.

Textos especialitzats:

- F. A. Cotton, *La Teoría de grupos aplicada a la Química*, 2a Ed., Limusa-Wiley, 1999.
- P. Atkins, R. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics*, 5th Ed., Oxford University Press, 2011.